ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

Exercices de Physique du Solide — Prof. H. Brune

Série No. 9 — **15 Avril 2025**

But de cette série : comprendre l'effet d'un potentiel périodique faible sur les états d'électron libre (électrons quasi-libres)

1. Electrons libres à 1D, approximation du réseau vide

On considère un gaz d'électrons libres à une dimension dans réseau de constante a. Dans l'approximation du réseau vide, le potentiel associé aux ions est nul.

(a) Esquisser quelques points du réseau réciproque. Indiquer la première, la deuxième et troisième zone de Brillouin.

(b) Représenter $E(k)$ en fonction de k (schéma de zone étendue).
Representer aussi $E(k-G)$ pour $G = \pm\frac{2\pi}{a}$ (schéma de zone répétée).

(c) Représenter $E(k-G)$ en fonction de k uniquement dans la première zone de Brillouin (schéma de zone réduite), en considérant les vecteurs du réseau réciproque $G = 0$, $G = \pm\frac{2\pi}{a}$, $G = \pm\frac{4\pi}{a}$. (Axe vertical : unités de $\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\pi}{a})^2$.)

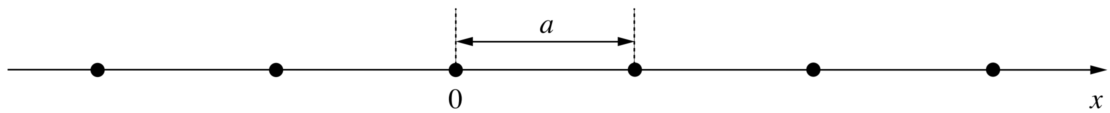
(d) Expliquer la signification et l'utilité des trois représentations (schéma de zone étendue, répétée, réduite).

(e) Considérer un système composé de N cellules primitives.
- Quel est le nombre de vecteurs d'onde k dans la première zone de Brillouin ?

Déterminer la position de l'énergie de Fermi ($T = 0$ K) en unités de $\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\pi}{a})^2$ dans le cas d'un système comportant :
- un atome par cellule et un électron de valence par atome ;
- un atome par cellule et deux électrons de valence par atome ;
- deux atomes par cellule et un électron de valence par atome.

2. Electrons à 1D dans un potentiel périodique faible

On considère un gaz d'électrons libres à une dimension dans un réseau de constante a, avec un atome (ion) par maille comme montré dans la figure ci-dessous. Considérer qu'il y a un atome en $x = 0$.



La relation entre énergie et vecteur d'onde pour les électrons libres est donnée par :

$$E^0_{k-G_i} = \frac{\hbar^2(k-G_i)^2}{2m} \tag{1}$$

Pour $k = \frac{\pi}{a}$ (au bord de la première zone de Brillouin) les bandes générées par les vecteurs G_i du réseau réciproque $G_1 = 0$ et $G_2 = \frac{2\pi}{a}$ ont la même énergie (voir exercice 1).

On considère maintenant le gaz électronique en présence d'un potentiel périodique faible $U(x)$. Pour des états presque dégénérés, au premier ordre l'énergie $E(k)$ est donnée par la relation (voir polycopié, éq. 5.41) :

$$(E^0_{k-G_i} - E)\, c_{k-G_i} + \sum_{j=1}^{m} U_{G_j-G_i}\, c_{k-G_j} = 0 \tag{2}$$
$$i, j = 1 \ldots m \qquad \text{tels que } \; |E^0_{k-G_i} - E^0_{k-G_j}| \lesssim U$$

Les c_{k-G} sont les coefficients de Fourier des fonctions d'onde, les U_G les coefficients de Fourier du potentiel.

(a) Considérer un potentiel périodique simple de la forme suivante :

$$U(x) = -2\bar{U}\cos(\frac{2\pi}{a}x) \qquad \text{avec } \bar{U} \text{ une constante, } \; \bar{U} > 0$$

Representer $U(x)$: par rapport à la position des ions, où le potentiel est-il attractif/répulsif ?
Déterminer quels sont les vecteurs G du réseau réciproque pour lesquels les coefficients U_G sont non nuls, et trouver la valeur de U_G.

(b) En utilisant la relation (2), écrire le système d'équations pour les niveaux d'énergie proches du point $k = \frac{\pi}{a}$.
Résoudre le système pour obtenir l'expression pour $E^{\pm}(k)$ en fonction de E^0_k et de $\bar{U}$.
Représenter $E^{\pm}(k)$ en fonction de k, en comparaison avec E^0_k.

(c) Les fonctions d'onde pour des électrons de Bloch sont de la forme :

$$\psi_k(x) = \sum_j c_{k-G_j} \exp[i(k - G_j)x]$$

En utilisant les équations trouvées au point (b), déterminer l'expression pour les deux fonctions d'onde relatives aux solutions $E^{\pm}$ pour $k = \frac{\pi}{a}$.

(d) Représenter la densité de probabilité $|\psi(x)|^2$ en fonction de x pour les deux fonctions d'onde. Où est localisé la charge électronique dans les deux cas ? Quelle est la corrélation avec le potentiel $U(x)$?